Interpretazione delle relazioni cinematiche e meccaniche secondo la teoria dei quanti[1]

W. Heisenberg a Gottinga.

(ricevuto il 29 luglio 1925)

Nel lavoro si cercherà di ottenere i fondamenti per una meccanica della teoria dei quanti che sia basata esclusivamente su relazioni tra quantità osservabili in linea di principio.

È noto che contro le regole formali che in generale si utilizzano nella teoria dei quanti per calcolare quantità osservabili (per esempio l'energia nell'atomo di idrogeno) si può sollevare la grave obiezione che quelle regole di calcolo contengono come elemento essenziale relazioni tra quantità che apparentemente non possono essere osservate in linea di principio (come per esempio posizione, periodo dell'elettrone), che quindi a quelle regole manca evidentemente ogni fondamento fisico chiaro, purché non si voglia ancor sempre attaccarsi alla speranza che quelle quantità finora inosservabili possano forse in seguito essere rese accessibili sperimentalmente. Si potrebbe considerare questa speranza come giusta se le suddette regole fossero tra loro coerenti e applicabili ad un dominio precisamente definito di problemi della teoria dei quanti. Ma l'esperienza mostra che solo l'atomo di idrogeno e l'effetto Stark di quest'atomo ubbidiscono a quelle regole formali, e che già nel problema dei "campi incrociati" (atomo di idrogeno in campi elettrico e magnetico di direzioni diverse) appaiono difficoltà fondamentali, che la reazione dell'atomo a campi variabili periodicamente non può certamente essere descritta con le regole suddette, e che infine un'estensione delle regole quantiche alla trattazione dell'atomo con più elettroni si è dimostrata impossibile. È divenuto abituale indicare questi fallimenti delle regole della teoria dei quanti, che erano caratterizzate proprio dall'applicazione della meccanica classica, come scostamento dalla meccanica classica. Ma questa designazione non può affatto considerarsi sensata, se si pensa che già la condizione di Einstein-Bohr delle frequenze (valida del tutto in generale) rappresenta un rifiuto così totale della meccanica classica o meglio, dal punto di vista della teoria ondulatoria, della cinematica che sta alla base di questa meccanica, che anche nei problemi più semplici di teoria dei quanti non si può assolutamente pensare ad una validità della meccanica classica. In questa situazione mi sembra più consigliabile abbandonare completamente quella speranza in un'osservazione delle quantità finora inosservabili (come posizione, periodo dell'elettrone), quindi al tempo stesso ammettere che l'accordo parziale delle suddette regole quantiche con l'esperienza sia più o meno casuale, e cercare di costruire una meccanica della teoria dei quanti analoga alla meccanica classica, nella quale intervengano solo relazioni tra quantità osservabili. Come i più importanti, primi postulati di una siffatta meccanica della teoria dei quanti si possono considerare accanto alla condizione delle frequenze la teoria della dispersione di Kramers[2] ed i lavori[3] che costruiscono oltre a partire da questa teoria. Nel seguito cercheremo

[1] Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen, Zeitschr. f. Phys. **33**, 879-893 (1925).

[2] H. v. Kramers, Nature **113**, 673, 1924.

[3] M. Born, ZS. f. Phys. **26**, 379, 1924. H.A. Kramers, W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **31**, 681, 1925. M. Born, P. Jordan, ZS. f. Phys. (in stampa).

di proporre alcune relazioni quantomeccaniche nuove e le utilizzeremo nella trattazione completa di alcuni problemi particolari. Ci limiteremo in questo a problemi con un grado di libertà.

§1. Nella teoria classica la radiazione di un elettrone in moto (nella zona d'onda, cioè con $\mathfrak{E} \sim \mathfrak{H} \sim 1/r$) non è data solo dalle espressioni:

$$\mathfrak{E} = \frac{e}{r^3 c^2} [\mathfrak{r} [\mathfrak{r} \dot{\mathfrak{v}}]] ,$$
$$\mathfrak{H} = \frac{e}{r^2 c^2} [\dot{\mathfrak{v}} \mathfrak{r}] ,$$

ma in ulteriore approssimazione intervengono ancora termini per esempio della forma

$$\frac{e}{rc^3} \dot{\mathfrak{v}} \mathfrak{v},$$

che si possono indicare come "radiazione di quadrupolo"; in approssimazione ancora più alta termini per esempio della forma

$$\frac{e}{rc^4} \dot{\mathfrak{v}} \mathfrak{v}^2;$$

in questo modo l'approssimazione si può spingere avanti a piacere (in quanto sopra $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{H}$ indicano le intensità di campo nel punto corrente, e la carica dell'elettrone, $\mathfrak{r}$ la distanza dell'elettrone dal punto corrente, $\mathfrak{v}$ la velocità dell'elettrone).

Ci si può chiedere come si devono considerare nella teoria dei quanti quei termini superiori. Poiché nella teoria classica le approssimazioni superiori possono essere calcolate facilmente quando sia dato il moto dell'elettrone ovvero la sua rappresentazione di Fourier, ci si attenderà l'analogo nella teoria dei quanti. Questo problema non ha niente a che fare con l'elettrodinamica, ma è, e questo ci pare particolarmente importante, di natura puramente cinematica; possiamo porlo nella forma più semplice così: sia data una grandezza della teoria dei quanti che compare al posto della grandezza classica $x(t)$; quale grandezza della teoria dei quanti appare allora al posto di $x(t)^2$?

Prima di poter rispondere a questa domanda dobbiamo ricordarci che nella teoria dei quanti non era possibile associare all'elettrone un punto nello spazio in funzione del tempo per mezzo di quantità osservabili. Ma anche nella teoria dei quanti si può ben associare all'elettrone un irraggiamento; questa radiazione sarà descritta secondo la teoria dei quanti in primo luogo mediante le frequenze che compaiono come funzioni di due variabili, nella forma:

$$\nu(n, n-\alpha) = \frac{1}{h} \{W(n) - W(n-\alpha)\} ,$$

nella teoria classica nella forma:

$$\nu(n, \alpha) = \alpha \cdot \nu(n) = \alpha \frac{1}{h} \frac{dW}{dn}.$$

(Qui si è posto $n \cdot h = J$, una delle costanti canoniche).

Come caratteristiche per il confronto della teoria classica con la teoria quantistica riguardo alle frequenze si possono considerare le relazioni di combinazione:

classicamente:

$$\nu(n,\alpha)+\nu(n,\beta)=\nu(n,\alpha+\beta).$$

quantisticamente:

$$\nu(n,n-\alpha)+\nu(n-\alpha,n-\alpha-\beta)=\nu(n,n-\alpha-\beta)$$
$$\text{ovvero } \nu(n-\beta,n-\alpha-\beta)+\nu(n,n-\beta)=\nu(n,n-\alpha-\beta).$$

Accanto alle frequenze sono in secondo luogo necessarie per la descrizione della radiazione le ampiezze; le ampiezze si possono assumere come vettori complessi (ciascuno con sei componenti indipendenti) e determinano polarizzazione e fase. Anch'esse sono funzioni delle due variabili n ed α, di modo che la parte in questione della radiazione sarà data dall'espressione seguente:

quantisticamente:

$$\mathrm{Re}\left\{\mathfrak{A}(n,n-\alpha)\exp\left[i\omega(n,n-\alpha)t\right]\right\}. \tag{1}$$

classicamente:

$$\mathrm{Re}\left\{\mathfrak{A}_\alpha(n)\exp\left[i\omega(n)\cdot\alpha t\right]\right\}. \tag{2}$$

Non pare a prima vista che alla fase contenuta in $\mathfrak{A}$ si confaccia un significato fisico nella teoria dei quanti, poiché le frequenze della teoria dei quanti in generale non sono commensurabili con le armoniche superiori. Ma vedremo immediatamente che la fase anche nella teoria dei quanti ha un significato preciso, analogo a quello nella teoria classica. Consideriamo ora una determinata quantità $x(t)$ nella teoria classica; la possiamo pensare rappresentata mediante un insieme di quantità della forma

$$\mathfrak{A}_\alpha(n)\exp\left[i\omega(n)\cdot\alpha t\right],$$

che, a seconda che il moto sia periodico o no, riunite in una somma o in un integrale rappresentano $x(t)$:

$$\begin{aligned} x(n,t) &= \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty}\mathfrak{A}_\alpha(n)\exp\left[i\omega(n)\cdot\alpha t\right], \\ x(n,t) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\mathfrak{A}_\alpha(n)\exp\left[i\omega(n)\cdot\alpha t\right]d\alpha. \end{aligned} \tag{2a}$$

Un modo siffatto di riunire le corrispondenti quantità della teoria dei quanti appare, a motivo dell'uguale importanza delle quantità n, $n-\alpha$ impossibile senza arbitrarietà e perciò non sensato; ma si può considerare la totalità delle quantità

$$\mathfrak{A}(n,n-\alpha)\exp\left[i\omega(n,n-\alpha)t\right]$$

come rappresentativa della quantità $x(t)$, e cercare di rispondere poi alla domanda: con che cosa si rappresenta la quantità $x(t)^2$?

La risposta classica è evidentemente:

$$\mathfrak{B}_\beta(n) \exp\left[i\omega(n)\beta t\right] = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} \exp\left[i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t\right] \tag{3}$$

$$\text{ovvero } = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} \exp\left[i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t\right] d\alpha, \tag{4}$$

e quindi

$$x(t)^2 = \sum_{\beta=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) \exp\left[i\omega(n)\beta t\right] \tag{5}$$

$$\text{ovvero } = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) \exp\left[i\omega(n)\beta t\right] d\beta. \tag{6}$$

Dal punto di vista della teoria dei quanti l'ipotesi più semplice e naturale pare quella di sostituire le relazioni (3, 4) con le seguenti:

$$\begin{aligned} &\mathfrak{B}(n, n-\beta) \exp\left[i\omega(n, n-\beta)t\right] \\ &= \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{A}(n-\alpha, n-\beta) \exp\left[i\omega(n, n-\beta)t\right] \end{aligned} \tag{7}$$

$$\text{ovvero } = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{A}(n-\alpha, n-\beta) \exp\left[i\omega(n, n-\beta)t\right], \tag{8}$$

e proprio questo modo di combinare risulta quasi spontaneamente dalla relazione di combinazione delle frequenze. Se si fanno queste ipotesi (7) e (8) si riconosce anche che le fasi delle $\mathfrak{A}$ definite dalla teoria dei quanti hanno un significato fisico altrettanto grande che nella teoria classica: solo l'origine del tempo e quindi una costante di fase comune a tutte le $\mathfrak{A}$ è arbitraria e priva di significato fisico; tuttavia le fasi delle singole $\mathfrak{A}$ intervengono in modo essenziale[4] nella quantità $\mathfrak{B}$. Un'interpretazione geometrica di tali relazioni di fase della teoria dei quanti in analogia con la teoria classica non sembra per il momento possibile.

Se ci interroghiamo inoltre sulla rappresentazione della quantità $x(t)^3$, troviamo senza difficoltà:

classicamente:

$$\mathfrak{C}(n, \gamma) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \sum_{\beta=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)\mathfrak{A}_\beta(n)\mathfrak{A}_{\gamma-\alpha-\beta}(n), \tag{9}$$

[4] Vedasi anche H.A. Kramers e W. Heisenberg, l.c. Nell'espressione là utilizzata per il momento disperdente indotto le fasi intervengono in modo essenziale.

quantisticamente:

$$(10)\quad \mathfrak{C}(n, n-\gamma) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \sum_{\beta=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{A}(n-\alpha, n-\alpha-\beta)\mathfrak{U}(n-\alpha-\beta, n-\gamma)$$

ovvero gli integrali corrispondenti.

In modo analogo si possono rappresentare secondo la teoria dei quanti tutte le quantità della forma $x(t)^n$, ed evidentemente quando sia data una qualche funzione $f[x(t)]$ si può sempre, se questa funzione è sviluppabile in serie di potenze di x, trovare l'analogo della teoria dei quanti. Sorge tuttavia una difficoltà essenziale quando consideriamo due quantità $x(t)$, $y(t)$ e ci interroghiamo sul prodotto $x(t)y(t)$.

Sia $x(t)$ caratterizzata da $\mathfrak{A}$, $y(t)$ da $\mathfrak{B}$, allora si ottiene come rappresentazione di $x(t) \cdot y(t)$:

classicamente:

$$\mathfrak{C}_\beta(n) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)\mathfrak{B}_{\beta-\alpha}(n).$$

quantisticamente:

$$\mathfrak{C}(n, n-\beta) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha))\mathfrak{B}(n-\alpha, n-\beta).$$

Mentre classicamente $x(t) \cdot y(t)$ sarà sempre uguale a $y(t)x(t)$, in generale ciò non capita nella teoria dei quanti. - In casi particolari, per esempio nella rappresentazione di $x(t)x(t)^2$, questa difficoltà non compare.

Quando si tratta, come nella questione posta all'inizio di questo paragrafo, della rappresentazione della forma

$$v(t)\dot{v}(t),$$

per la teoria dei quanti si dovrà sostituire $v\dot{v}$ con $(v\dot{v} + \dot{v}v)/2$, per ottenere che $v\dot{v}$ risulti come derivata di $v^2/2$. Analogamente si possono sempre dare in modo naturale i valori medi secondo la teoria dei quanti, i quali però sono ipotetici in grado ancor più alto che le formule (7) e (8).

A prescindere dalla difficoltà prima descritta formule del tipo (7), (8) potrebbero bastare in generale ad esprimere anche l'interazione degli elettroni in un atomo mediante le ampiezze caratteristiche.

§2. Dopo queste considerazioni che avevano per oggetto la cinematica della teoria dei quanti passeremo al problema meccanico, che ha per scopo la determinazione di $\mathfrak{A}$, ν, W dalle forze date del sistema. Nella teoria usata finora questo problema viene risolto in due passi:

1. Integrazione dell'equazione di moto

$$(11)\qquad \ddot{x} + f(x) = 0.$$

2. Determinazione della costante nei moti periodici mediante

$$(12)\qquad \oint p dq = \oint m\dot{x} dx = J \;(= nh).$$

Se ci si propone di costruire una meccanica della teoria dei quanti che sia il più possibile analoga a quella classica è assai naturale trasferire direttamente l'equazione del moto (11) nella teoria dei quanti, per la qual cosa è solo necessario - per non discostarsi dal fondamento certo delle quantità osservabili in linea di principio - in luogo delle quantità $\ddot{x}$, $f(x)$ porre le loro rappresentanti della teoria dei quanti note dal §1. Nella teoria classica è possibile cercare la soluzione della (11) mediante l'ipotesi che x sia una serie di Fourier o un integrale di Fourier con coefficienti (e frequenze) indeterminati; otteniamo però allora in generale infinite equazioni con infinite incognite ovvero equazioni integrali, che solo in casi speciali si possono trasformare in semplici formule di ricorrenza per le $\mathfrak{A}$. Nella teoria dei quanti siamo tuttavia provvisoriamente condotti a questo tipo di soluzione della (11) poiché, come prima detto, non si può definire nessuna funzione della teoria dei quanti che sia l'analogo diretto della funzione $x(n, t)$.

Ciò ha per conseguenza che la soluzione secondo la teoria dei quanti della (11) è eseguibile immediatamente solo nei casi più semplici. Prima di addentrarci in tali esempi semplici si deve ancora derivare la determinazione secondo la teoria dei quanti della costante della (12). Assumiamo quindi che il moto (classicamente) sia periodico:

$$x = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} a_\alpha(n) \exp\left[i\alpha\omega_n t\right]; \tag{13}$$

allora si ha

$$m\dot{x} = m \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} a_\alpha(n) i\alpha\omega_n \exp\left[i\alpha\omega_n t\right]$$

e

$$\oint m\dot{x}dx = \oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} a_\alpha(n) a_{-\alpha}(n)\alpha^2\omega_n.$$

Poichè inoltre $a_{-\alpha}(n) = \overline{a_\alpha(n)}$ (x dev'essere reale), risulta

$$\oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} |a_\alpha(n)|^2\alpha^2\omega_n. \tag{14}$$

Finora per lo più quest'integrale di fase lo si è posto uguale ad un multiplo intero di h, cioè uguale ad $n.h$; ma una tale condizione non solo la si introduce in modo assai forzato nel calcolo meccanico; essa appare arbitraria già dal punto di vista usato finora, in base al principio di corrispondenza; infatti secondo la corrispondenza i J sono fissati come multipli interi di h solo a meno di una costante additiva, e al posto della (14) si dovrebbe naturalmente considerare l'equazione:

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn}\oint m\dot{x}^2 dt,$$

cioè

$$h = 2\pi m \cdot \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{d}{dn}(\alpha\omega_n \cdot |a_\alpha|^2). \tag{15}$$

Una siffatta condizione fissa però gli a_α solo a meno di una costante, e questa indeterminazione ha empiricamente dato luogo a difficoltà nella comparsa di numeri quantici semiinteri.

Ma se chiediamo una relazione di teoria dei quanti tra quantità osservabili in corrispondenza alla (14) o alla (15), l'univocità mancante si ripristina da sè.

In particolare l'equazione (15) possiede proprio una trasformazione semplice secondo la teoria dei quanti che si collega alla teoria della dispersione di Kramers[5]

$$h = 4\pi m \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left\{ |a(n,n+\alpha)|^2 \omega(n,n+\alpha) - |a(n,n-\alpha)|^2 \omega(n,n-\alpha) \right\}; \tag{16}$$

questa relazione basta qui a determinare univocamente gli a; infatti le costanti momentaneamente indeterminate nelle quantità a saranno automaticamente determinate dalla condizione che debba esistere uno stato normale, dal quale non ha più luogo alcun irraggiamento; se lo stato normale è indicato con n_0, per tutte le $a(n_0, n_0 - \alpha)$ dovrà essere

$$a(n_0, n_0 - \alpha) = 0 \text{ per } \alpha > 0.$$

La questione della quantizzazione intera o semiintera perciò non dovrebbe poter comparire in una meccanica della teoria dei quanti che utilizza solo relazioni tra quantità osservabili.

Le equazioni (11) e (16) insieme contengono, quando si sappiano risolvere, una determinazione completa non solo delle frequenze e delle energie, ma anche delle probabilità di transizione della teoria dei quanti. L'esecuzione matematica effettiva riesce tuttavia per ora solo nei casi più semplici; una complicazione particolare deriva inoltre in molti sistemi, come per esempio nell'atomo di idrogeno, dal fatto che le soluzioni corrispondono a moti in parte periodici, in parte aperiodici, cosa che ha per conseguenza il fatto che le serie della teoria dei quanti (7), (8) e l'equazione (16) si spezzano sempre in una somma e in un integrale. Secondo la meccanica quantistica quindi una separazione in "moti periodici e aperiodici" in generale non si può eseguire.

Malgrado ciò le equazioni (11) e (16) si potrebbero forse considerare per lo meno in linea di principio come una soluzione soddisfacente del problema meccanico, se si potesse mostrare che questa soluzione è in accordo ovvero non è in contrasto con le relazioni quantomeccaniche finora note; che quindi una piccola perturbazione di un problema meccanico dà luogo a termini aggiuntivi nell'energia o nelle frequenze, che corrispondono proprio alle espressioni trovate da Kramers e Born - in contrasto con quelle che produrrebbe la teoria classica. Inoltre si dovrebbe cercare se in generale l'equazione (11) anche nell'interpretazione della teoria dei quanti qui proposta ammetta un integrale dell'energia $m\dot{x}^2/2 + U(x) = \text{cost.}$ e se l'energia così ottenuta - in analogia a come succede classicamente: $\nu = \partial W/\partial J$ - soddisfi la condizione: $\Delta W = h \cdot \nu$. Una risposta generale a queste domande potrebbe in primo luogo mostrare la connessione profonda tra i tentativi di meccanica quantistica fatti finora e portare ad una meccanica quantistica coerente che operi solo con quantità osservabili. A prescindere da una relazione generale tra la formula di dispersione

[5]Questa relazione è già stata data in base a trattazioni della dispersione da W. Kuhn, ZS. f. Phys. **33**, 408, 1925, e da Thomas, Naturw. **13**, 1925.

di Kramers e le equazioni (11) e (16) possiamo rispondere alle domande su poste solo nei casi del tutto particolari risolubili mediante una semplice ricorrenza.

Quella relazione generale tra la teoria della dispersione di Kramers e le nostre equazioni (11), (16) consiste nel fatto che dall'equazione (11) cioè dal suo analogo secondo la teoria dei quanti come nella teoria classica discende che l'elettrone oscillante si comporta come un elettrone libero rispetto a luce che abbia lunghezza d'onda assai più corta di tutte le oscillazioni proprie del sistema. Questo risultato discende anche dalla teoria di Kramers, quando ancora si tenga conto dell'equazione (16). Infatti Kramers trova per il momento indotto mediante l'onda $E\cos 2\pi\nu t$:

$$M = e^2 E\cos 2\pi\nu t\cdot\frac{2}{h}\sum_{\alpha=0}^{\infty}\left\{\frac{|a(n,n+\alpha)|^2\nu(n,n+\alpha)}{\nu^2(n,n+\alpha)-\nu^2}-\frac{|a(n,n-\alpha)|^2\nu(n,n-\alpha)}{\nu^2(n,n-\alpha)-\nu^2}\right\},$$

quindi per $\nu \gg \nu(n,n+\alpha)$

$$M = -\frac{2Ee^2\cos 2\pi\nu t}{\nu^2\cdot h}\sum_{\alpha=0}^{\infty}\left\{|a(n,n+\alpha)|^2\nu(n,n+\alpha)-|a(n,n-\alpha)|^2\nu(n,n-\alpha)\right\},$$

che per la (16) diventa

$$M = -\frac{e^2E\cos 2\pi\nu t}{\nu^2\cdot 4\pi^2 m}.$$

§3. Come esempio semplicissimo si tratterà nel seguito l'oscillatore anarmonico:

$$\ddot{x}+\omega_0^2 x+\lambda x^2 = 0. \tag{17}$$

Classicamente quest'equazione si soddisfa con un "Ansatz" della forma

$$x = \lambda a_0 + a_1\cos\omega t+\lambda a_2\cos 2\omega t+\lambda^2 a_3\cos 3\omega t+\cdots+\lambda^{\tau-1}a_\tau\cos\tau\omega t,$$

dove gli a sono serie di potenze in λ, che cominciano con un termine privo di λ. Dal punto di vista della teoria dei quanti proviamo un "Ansatz" analogo e rappresentiamo x con termini della forma

$$\lambda a(n,n);\ a(n,n-1)\cos\omega(n,n-1)t;\ \lambda a(n,n-2)\cos\omega(n,n-2)t;$$
$$\ldots\lambda^{\tau-1}a(n,n-\tau)\cos\omega(n,n-\tau)t\ldots$$

Per le equazioni (3), (4) e rispettivamente (7), (8), la formula di ricorrenza per la determinazione di a e di ω si scrive (fino a termini dell'ordine λ inclusi):

classicamente:

$$\begin{aligned}\omega_0^2 a_0(n)+\frac{a_1^2(n)}{2}&=0;\\ -\omega^2+\omega_0^2&=0;\\ (-4\omega^2+\omega_0^2)a_2(n)+\frac{a_1^2}{2}&=0;\\ (-9\omega^2+\omega_0^2)a_3(n)+a_1a_2&=0;\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots&\end{aligned}\tag{18}$$

quantisticamente:

$$
\begin{aligned}
\omega_0^2 a_0(n) + \frac{a^2(n+1,n)+a^2(n,n-1)}{4} &= 0;\\
-\omega^2(n,n-1)+\omega_0^2 &= 0;\\
(-\omega^2(n,n-2)+\omega_0^2)a(n,n-2)+\frac{a(n,n-1)a(n-1,n-2)}{2} &= 0;\\
(-\omega^2(n,n-3)+\omega_0^2)a(n,n-3)&\\
+\frac{a(n,n-1)a(n-1,n-3)}{2}+\frac{a(n,n-2)a(n-2,n-3)}{2} &= 0;\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&
\end{aligned}
\tag{19}
$$

Perciò si ha la condizione quantica

classicamente $(J = nh)$:

$$1 = 2\pi m \frac{d}{dJ}\sum_{-\infty}^{+\infty}\tau^2\frac{|a_\tau|^2\omega}{4}.$$

quantisticamente:

$$h = \pi m \sum_0^\infty \left[|a(n+\tau,n)|^2\omega(n+\tau,n) - |a(n,n-\tau)|^2\omega(n,n-\tau)\right].$$

Ciò dà in prima approssimazione, sia classicamente che quantisticamente:

$$a_1^2(n), \quad \text{rispettivamente } a^2(n,n-1) = \frac{(n+\text{cost.})h}{\pi m\omega_0}. \tag{20}$$

Quantisticamente la costante nella (20) si determina con la condizione che nello stato normale $a(n_0, n_0-1)$ dev'essere zero. Se numeriamo gli n in modo che n sia uguale a zero nello stato normale, quindi $n_0 = 0$, risulta

$$a^2(n,n-1) = \frac{nh}{\pi m\omega_0}.$$

Dalle equazioni di ricorrenza (18) segue allora che nella teoria classica a_τ (in prima approssimazione in λ) sarà della forma $\kappa(\tau)n^{\frac{\tau}{2}}$, dove $\kappa(\tau)$ rappresenta un fattore indipendente da n. Nella teoria quantistica risulta dalla (19)

$$a(n,n-\tau) = \kappa(\tau)\sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}, \tag{21}$$

dove $\kappa(\tau)$ indica lo stesso fattore di proporzionalità indipendente da n. Naturalmente per grandi valori di n il valore di a_τ della teoria dei quanti tende asintoticamente a quello classico.

Per l'energia è naturale studiare l'ipotesi classica

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2\frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{3}x^3 = W,$$

che anche secondo la teoria dei quanti è realmente costante e per le (19), (20) e (21) ha il valore:

classicamente:

$$W = \frac{nh\omega_0}{2\pi}. \tag{22}$$

quantisticamente [secondo le (7), (8)]:

$$W = \frac{(n + \frac{1}{2})h\omega_0}{2\pi} \tag{23}$$

(fino a quantità dell'ordine λ^2 compreso).

Secondo quest'idea già per l'oscillatore armonico l'energia non è rappresentabile secondo la "meccanica classica", cioè con la (22), ma ha la forma (23).

Il calcolo più esatto anche delle approssimazioni superiori in W, a, ω si eseguirà per l'esempio più semplice di un oscillatore armonico del tipo:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0.$$

Qui si può porre classicamente:

$$x = a_1 \cos \omega t + \lambda a_3 \cos 3\omega t + \lambda^2 a_5 \cos 5\omega t + \dots,$$

analogamente tentiamo per la teoria quantistica l'"Ansatz"

$$a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t; \;\; \lambda a(n, n-3) \cos \omega(n, n-3)t; \dots$$

Le quantità a sono di nuovo serie di potenze in λ, il primo termine delle quali, come nella (21), ha la forma

$$a(n, n-\tau) = \kappa(\tau)\sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}},$$

come si ottiene calcolando le equazioni corrispondenti alle (18), (19).

Se si porta il calcolo di ω, a secondo le (18), (19) fino alle approssimazioni λ^2 e rispettivamente λ, si ottiene:

$$\omega(n, n-1) = \omega_0 + \lambda \cdot \frac{3nh}{8\pi\omega_0^2 m} - \lambda^2 \cdot \frac{3h^2}{256\omega_0^5 m^2 \pi^2}(17n^2 + 7) + \dots \tag{24}$$

$$a(n, n-1) = \sqrt{\frac{nh}{\pi\omega_0 m}}\left(1 - \lambda\frac{3nh}{16\pi\omega_0^3 m} + \dots\right). \tag{25}$$

$$a(n, n-3) = \frac{1}{32}\sqrt{\frac{h^3}{\pi^3\omega_0^7 m^3} n(n-1)(n-2)}\left(1 - \lambda\frac{39(n-1)h}{32\pi\omega_0^3 m}\right). \tag{26}$$

L'energia, definita come il termine costante di

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2\frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{4}x^4,$$

(non ho saputo dimostrare in generale che i termini periodici sono tutti nulli, ma ciò accade nei termini calcolati), risulta essere

$$\begin{aligned} W = \frac{(n+\frac{1}{2})h\omega_0}{2\pi} + \lambda \cdot \frac{3(n^2+n+\frac{1}{2})h^2}{8\cdot 4\pi^2\omega_0^2\cdot m} \\ -\lambda^2 \cdot \frac{h^3}{512\pi^3\omega_0^5 m^2}\left(17n^2 + \frac{51}{2}n^2 + \frac{59}{2}n + \frac{21}{2}\right). \end{aligned} \tag{27}$$

Quest'energia si può anche calcolare con il procedimento di Kramers-Born, assumendo il termine $m\lambda x^4/4$ come termine perturbativo dell'oscillatore armonico. Allora si ritrova proprio il risultato (27), cosa che mi pare una conferma degna di nota per le equazioni quantomeccaniche di base. Inoltre l'energia calcolata con la (27) soddisfa alla formula [vedi (24)]:

$$\frac{\omega(n,n-1)}{2\pi} = \frac{1}{h}\cdot[W(n) - W(n-1)],$$

che parimenti va considerata come condizione necessaria per la possibilità di una determinazione delle probabilità di transizione corrispondente alle equazioni (11) e (16).

Per concludere si introdurrà come esempio il rotatore e si daranno indicazioni sul rapporto delle equazioni (7), (8) con le formule dell'intensità per l'effetto Zeeman[6] e per i multipletti[7].

Il rotatore sia rappresentato da un elettrone che ruota a distanza costante a attorno ad un nucleo. Allora le "equazioni del moto" sia classicamente che secondo la teoria dei quanti dicono solo che l'elettrone descrive attorno al nucleo una rotazione piana uniforme alla distanza costante a con la velocità angolare ω. La "condizione quantica" dà secondo la (12):

$$h = \frac{d}{dn}(2\pi m a^2\omega),$$

secondo la (16):

$$h = 2\pi m\{a^2\omega(n+1,n) - a^2\omega(n,n-1)\},$$

e in entrambi i casi risulta:

$$\omega(n,n-1) = \frac{h\cdot(n+\text{cost.})}{2\pi m a^2}.$$

La condizione che nello stato normale ($n_0 = 0$) la radiazione debba essere nulla porta alla formula

$$\omega(n,n-1) = \frac{h\cdot n}{2\pi m a^2}.$$

[6]Goudsmit e R. de L. Kronig, Naturw. **13**, 90, 1925; H. Hönl, ZS. f. Phys. **31**, 340, 1925.

[7]R. de L. Kronig, ZS. f. Phys. **31**, 885, 1925; A. Sommerfeld e H. Hönl, Sitzungsber. d. Preuß. Akad. d. Wiss. 1925, p. 141; H. N. Russell, Nature **115**, 835, 1925.

L'energia sarà

$$W = \frac{m}{2} v^2$$

ovvero per le (7), (8)

$$W = \frac{m}{2} a^2 \cdot \frac{\omega^2(n, n-1) + \omega^2(n+1, n)}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \tag{29}$$

che di nuovo soddisfa alla relazione

$$\omega(n, n-1) = \frac{2\pi}{h} \cdot [W(n) - W(n-1)].$$

Come conferma per le formule (28) e (29) che si discostano dalla teoria finora consueta si può considerare il fatto che molti spettri a bande (anche quelli per i quali l'esistenza di un impulso dell'elettrone è improbabile) secondo Kratzer[8] appaiono richiedere formule del tipo (28), (29) (che finora per attaccamento alla teoria meccanica classica si cercava di spiegare con quantizzazione semiintera).

Per giungere, nel caso del rotatore, alle formule di Goudsmit-Kronig-Hönl, dobbiamo abbandonare l'ambito dei problemi con un grado di libertà e assumere che il rotatore, a partire da una qualsiasi direzione nello spazio, esegua una precessione $\mathfrak{v}$ attorno all'asse z di un campo esterno. Il numero quantico corrispondente a questa precessione sia m. Allora il moto sarà rappresentato dalle quantità

$$\begin{aligned} z &: a(n, n-1; m, m) \cos \omega(n, n-1)t; \\ x + iy &: b(n, n-1; m, m-1) \exp i[\omega(n, n-1) + \mathfrak{v}]t; \\ &\quad\; b(n, n-1; m-1, m) \exp i[-\omega(n, n-1) + \mathfrak{v}]t. \end{aligned}$$

Le equazioni di moto si scrivono semplicemente:

$$x^2 + y^2 + z^2 = a^2,$$

e per la (7) danno luogo alle equazioni[9]

(30)

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} a^2(n, n-1; m, m) + b^2(n, n-1; m, m-1) + b^2(n, n-1; m, m+1) \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} a^2(n+1, n; m, m) + b^2(n+1, n; m-1, m) + b^2(n+1, n; m+1, m) \right\} = a^2. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} a(n, n-1; m, m) a(n-1, n-2; m, m) \\ &= b(n, n-1; m, m+1) b(n-1, n-2; m+1, m) \\ &+ b(n, n-1; m, m-1) b(n-1, n-2; m-1, m). \end{aligned} \tag{31}$$

Da qui per la (16) discende la condizione quantica:

(32)

$$\begin{aligned} 2\pi m \left\{ b^2(n, n-1; m, m-1)\omega(n, n-1) - b^2(n, n-1; m-1, m)\omega(n, n-1) \right\} \\ = (m + \text{cost.})h. \end{aligned}$$

[8] vedasi per esempio A. Kratzer, Sitzungsber. d. Bayr. Akad. 1922, p. 107.

[9] L'equazione (30) è essenzialmente identica alle regole di somma di Ornstein-Burger.

Le relazioni classiche corrispondenti a queste equazioni:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}a_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 &= a^2; \\
\frac{1}{4}a_0^2 &= b_1 b_{-1}; \\
2\pi m(b_{+1}^2 - b_{-1}^2)\omega &= (m + \text{cost.})h
\end{aligned}
\tag{33}
$$

bastano (a meno della costante indeterminata in m) a determinare univocamente a_0, b_1, b_{-1}.

La soluzione che si presenta più semplice delle equazioni (30), (31), (32) si scrive:

$$
\begin{aligned}
b(n, n-1; m, m-1) &= a\sqrt{\frac{(n+m+1)(n+m)}{4(n+\frac{1}{2})n}}; \\
b(n, n-1; m-1, m) &= a\sqrt{\frac{(n-m)(n-m+1)}{4(n+\frac{1}{2})n}}; \\
a(n, n-1; m, m) &= a\sqrt{\frac{(n+m+1)(n-m)}{4(n+\frac{1}{2})n}}.
\end{aligned}
$$

Queste espressioni coincidono con le formule di Goudsmit, Kronig e Hönl; non si può tuttavia vedere facilmente che queste espressioni rappresentano l'unica soluzione delle (30), (31), (32) - cosa che tuttavia mi sembra probabile tenendo conto delle condizioni al contorno (annullarsi di a, b ai "bordi", vedansi i su citati lavori di Kronig, Sommerfeld e Hönl, Russell).

Una trattazione analoga a quella qui esposta anche nel caso delle formule d'intensità dei multipletti porta al risultato che le sunnominate regole d'intensità sono in accordo con le equazioni (7) e (16). Di nuovo questo risultato dovrebbe considerarsi a sostegno in particolare della giustezza dell'equazione cinematica (7).

Se un metodo per la determinazione di dati della teoria dei quanti mediante relazioni tra quantità osservabili, come quello proposto qui, si possa già considerare soddisfacente in linea di principio, oppure se questo metodo rappresenti ancora un approccio troppo grossolano al problema fisico, per ora evidentemente assai intricato, di una meccanica della teoria dei quanti, lo si potrà conoscere solo mediante uno studio matermatico più approfondito del metodo qui usato assai superficialmente.

Göttingen, Institut für theoretische Physik.